

## Modelo Moderno

### Bases del modelo

#### Ondas electrónicas

La luz (ondas electromagnéticas) tiene no sólo un carácter ondulatorio sino que también corpuscular (ya sabido hacia 1920). Se aplica la ecuación de Plank  $E = h\nu$  (fotones), donde  $h$  es la constante de Planck y  $\nu$  la frecuencia. También se cumple  $\lambda = h/p$  (fotones), donde  $p = mv$ .

En 1924, de Broglie propuso, por similitud con los fotones, que los electrones también tenían un carácter ondulatorio y que se les aplicaban las dos ecuaciones anteriores. El electrón es un corpúsculo cuya masa incluso ya había sido medida.

La determinación de la estructura electrónica de los átomos se transforma entonces, dado que estas estructuras son estables, en un problema de ondas electrónicas estacionarias.

En 1927, Greninger y Germer demostraron experimentalmente que los electrones también tenían un carácter ondulatorio, validando la propuesta de de Broglie. Realizaron experiencias de difracción de ondas electrónicas con un cristal. La obtención de una imagen de difracción demostró que lo que se hacía incidir era una onda y que en el material había átomos ordenados (un cristal).

También sugirió de Broglie que el número  $n$  debería estar ligado con los modos normales de vibración de las ondas respectivas. Así, para una órbita circular de Bohr, demuestra uno de los postulados de Bohr (cuantificación del momento angular). En efecto:

$2\pi r = n\lambda$ , longitud de la órbita igual a un número entero de veces el  $\lambda$  electrónico (condición de onda estacionaria). Después, aplicando  $\lambda = h/mv$ , se llega a  $mv = nh/2\pi r$ .

#### Principio de incertidumbre de Heisenberg

Existen parejas de variables (variables conjugadas) cuyo valor no puede ser determinado con precisión infinita.

Una de estas parejas es la posición  $x$  y la cantidad de movimiento  $p$  de una partícula. Para ellas, el principio se expresa, en función de las respectivas incertidumbres:

$$\Delta p \Delta x = h/2\pi$$

Como  $h$  es un valor pequeño, este principio no afecta significativamente a los objetos que nos son habituales, pero sí, por ejemplo, a los electrones, protones, etc.

Esto significa que las soluciones de onda se expresarán como la probabilidad de encontrar a un electrón en un punto cualquiera del espacio. Este es un mundo no determinístico, hay incertidumbre, a diferencia de aquel de Newton.

#### Ecuación de la onda estacionaria

Para referirse a la amplitud de la onda electrónica, Schrödinger introdujo el empleo de la letra  $\Psi$ .

Lleguemos a la ecuación de interés a través de una analogía: el caso de una cuerda vibrante fija en sus extremos. La ecuación de esta cuerda es:

$$d^2u/dx^2 + (4\pi^2/\lambda^2)u = 0$$

La coordenada de posición a lo largo de la cuerda es  $x$ , en tanto que  $u$  es la desviación perpendicular (amplitud).

Nótese que  $\lambda$  es inversamente proporcional a  $mv$ . Por lo tanto  $\lambda^2$  es inversamente proporcional a la energía cinética del electrón. Complementariamente, la energía cinética se puede escribir como igual a  $(E_t - V)$ , donde  $E_t$  es la energía total y  $V$  la energía potencial.

De modo que, por analogía, para una onda electrónica estacionaria 3D, la expresión anterior queda:

$$(d^2\Psi/dx^2 + d^2\Psi/dy^2 + d^2\Psi/dz^2) + [(8\pi^2 m/h^2)(E_t - V)\Psi] = 0$$

Tal es la ecuación de Schrödinger.

### Resultados del modelo

Resolver el problema significa considerar la ecuación de onda y las condiciones de borde del orbital del elemento de interés, pasando por un complejo tratamiento físico matemático.

Veamos directamente los resultados más importantes desde nuestra perspectiva.

Resolver el problema significa, en particular, determinar el valor de  $\Psi$  en cada punto del espacio, normalmente en coordenadas polares.

### Interpretación de $\Psi$ .

Por analogía con los fotones, Born (1926) propuso correctamente que  $\Psi^2 dV$  en un punto del espacio, punto donde  $\Psi$  ha sido evaluado, corresponde a la probabilidad de encontrar un electrón en un volumen  $dV$  situado en la vecindad de dicho punto.

Tal analogía se basa en los siguientes antecedentes:

-la intensidad de una onda cualquiera es proporcional a su amplitud al cuadrado. Por tanto  $I$  es proporcional a  $A^2$ . Pero aquí al término  $A^2$  lo llamamos  $\Psi^2$ .

-para el caso electromagnético (luz), la intensidad de una radiación monocromática es proporcional al número de fotones, asociados a la respectiva frecuencia, que llega a una unidad de área de pantalla. Entonces la intensidad  $\Psi^2$  del haz sobre una pantalla es proporcional al número de corpúsculos por unidad de área.

-la luz sobre la pantalla es bidimensional. El problema electrónico es tridimensional.

### Números cuánticos

Al resolver la ecuación de Schrödinger reaparecen los números cuánticos orbitales  $n$ ,  $l$  y  $m$ , con un similar rango e interpretación a lo planteado en el modelo de Bohr. Se mantiene el spin electrónico, intrínseco al electrón, no dependiente del orbital.

### Orbitales electrónicos

Concepto de nubes de probabilidad tridimensionales.

Geometría de los orbitales **s**, **p**, **d**, **f**. Las de este modelo correcto son muy distintas a las órbitas planas de Bohr.

Un orbital queda caracterizado por tres números cuánticos:  $n$ ,  $l$  y  $m$ .

Como consecuencia del principio de Exclusión de Pauli, en un orbital a lo más puede haber dos electrones, a condición de tener spins opuestos.

Los orbitales tipo **s**, ya sea llenos o semilLENOS, tienen simetría esférica.

Siempre un conjunto de orbitales completos (llenos) tiene simetría electrónica esférica. Ejemplo, los tres orbitales  $n=2$  y  $l=1$ , que se completan con 6 electrones.

Si un conjunto de orbitales distinto de los orbitales **s** está incompletamente lleno con electrones, entonces la simetría electrónica de ese conjunto es no esférica.

Las configuraciones de los gases nobles ( $s^2p^6$ ) son muy estables y con simetría esférica. Estos gases son el He( $1s^2$ ) y otros gases (Ne, Ar, Kr, Xe y Rn) cuyo último orbital es del tipo ( $s^2p^6$ ), de "octeto completo". (A muy bajas temperaturas y  $p=1$  atm estos gases condensan (i.e., se licúan y solidifican); en particular, ellos son gases a temperatura ambiente y  $p=1$  atm).